

Otimização ELE037

Métodos Numéricos para Otimização Restrita

Jaime A. Ramírez
Felipe Campelo
Frederico G. Guimarães
Lucas S. Batista
Ricardo H.C. Takahashi

Universidade Federal de Minas Gerais
Departamento de Engenharia Elétrica

- 1 Introdução
- 2 Método de Lagrange
- 3 Método de Penalidades
- 4 Método do Lagrangeano Aumentado

- O objetivo desta unidade é o estudo de métodos numéricos para otimização de problemas com restrições.
- Forma geral do problema de otimização é definido por:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^* = \arg \min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \\ \text{sujeito a: } \begin{cases} g_i(\mathbf{x}) \leq 0; & i = 1, \dots, l \\ h_j(\mathbf{x}) = 0; & j = 1, \dots, m \end{cases} \end{aligned} \quad (1)$$

sendo que $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, $f(\cdot) : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^1$, $g(\cdot) : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^l$, e $h(\cdot) : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^m$.

A estratégia que será utilizada aborda o seguinte enfoque:

- Converter o problema restrito em um irrestrito; e
- Utilizar qualquer método apresentado no capítulo anterior.

Técnicas para transformação do problema restrito em irrestrito:

- Método de Penalidades (ou penalidade exterior);
- Método de Barreiras (ou penalidade interior);
- Método de Multiplicadores de Lagrange (ALM);
- etc.

Método de Lagrange

Introdução

- Conforme vimos, a solução do problem restrito a seguir

$$\min f(\mathbf{x}) \text{ sujeito a } h(\mathbf{x}) = 0$$

é um ponto crítico da função

$$L(\mathbf{x}, \lambda) = f(\mathbf{x}) + \lambda h(\mathbf{x})$$

- Ponto crítico implica que:

$$\begin{bmatrix} \nabla_{\mathbf{x}} L \\ \nabla_{\lambda} L \end{bmatrix} = 0$$

Método de Lagrange

Introdução

Função Lagrangeana

O ponto crítico da função Lagrangeana leva a um sistema com $n + 1$ equações e $n + 1$ incógnitas:

$$F(\mathbf{x}, \lambda) = \begin{cases} \nabla_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \lambda) = \nabla f(\mathbf{x}) + \lambda \nabla h(\mathbf{x}) = 0 \\ \nabla_{\lambda} L(\mathbf{x}, \lambda) = h(\mathbf{x}) = 0 \end{cases}$$

- O Método de Lagrange consiste na solução desse sistema de equações determinando $(\mathbf{x}^*, \lambda^*)$.

Método de Lagrange

Introdução

Exemplo

Seja o problema

$$\begin{aligned} \min f(\mathbf{x}) &= 3x_1 + 4x_2 \\ \text{s.a. } h(\mathbf{x}) &= x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0 \end{aligned}$$

Determine a solução usando o método de Lagrange.

Método de Lagrange

Introdução

- No caso geral:

$$\min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}, \mathbf{x} \in \mathcal{F}$$

$$\mathcal{F} = \begin{cases} g_i(\mathbf{x}) \leq 0; & i = 1, \dots, l \text{ (restrições de desigualdade)} \\ h_j(\mathbf{x}) = 0; & j = 1, \dots, m \text{ (restrições de igualdade)} \end{cases}$$

temos:

$$L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\lambda}) = f(\mathbf{x}) + \mathbf{g}'\boldsymbol{\mu} + \mathbf{h}'\boldsymbol{\lambda}$$

Método de Lagrange

Introdução

- A solução do problema restrito é a solução do sistema de $n + l + m$ equações

$$F(\mathbf{x}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\lambda}) = \begin{cases} \nabla_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\lambda}) = \nabla f(\mathbf{x}) + \mathbf{J}_h(\mathbf{x})' \boldsymbol{\lambda} + \mathbf{J}_g(\mathbf{x})' \boldsymbol{\mu} = 0 \\ \nabla_{\boldsymbol{\mu}} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\lambda}) \Rightarrow \mu_i g_i(\mathbf{x}) = 0 \\ \nabla_{\boldsymbol{\lambda}} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\lambda}) = \mathbf{h}(\mathbf{x}) = 0 \end{cases}$$

com:

$$\mathbf{J}_g(\mathbf{x})' = [\nabla g_1(\mathbf{x}) \cdots \nabla g_l(\mathbf{x})]_{n \times l}$$

$$\mathbf{J}_h(\mathbf{x})' = [\nabla h_1(\mathbf{x}) \cdots \nabla h_m(\mathbf{x})]_{n \times m}$$

Método de Lagrange

Introdução

Infelizmente, o Método de Lagrange não é muito prático, pelas seguintes razões:

- A construção do sistema de equações pressupõe acesso às expressões analíticas de $f(\mathbf{x})$, $g_i(\mathbf{x})$, $h_j(\mathbf{x})$;
- A resolução do problema de otimização não linear original requer a solução de um sistema de equações não lineares.

Método de Penalidades

Introdução

- A abordagem dos Métodos de Penalidades consiste na transformação do problema restrito original num problema irrestrito equivalente (dois problemas são ditos equivalentes se possuem a mesma solução);
- Método indireto para otimização restrita.

Método de Penalidades

Introdução

No método de Penalidades, penalidades são adicionadas à função-objetivo:

- 1 **Métodos de penalidade interior ou métodos Barreira:** pontos gerados devem ser sempre viáveis e qualquer tentativa de sair da região factível é penalizada.
- 2 **Métodos de penalidade exterior ou métodos de Penalidade:** qualquer violação de alguma restrição é penalizada no valor da função-objetivo.

Método de Penalidades

Introdução

Em geral, em problemas restritos a solução reside na fronteira da região factível:

- Nos métodos de penalidade interior, a solução ótima é aproximada **internamente** por uma sequência de soluções do problema irrestrito transformado;
- Nos métodos de penalidade exterior, a solução ótima é aproximada **externamente** por uma sequência de soluções do problema irrestrito transformado.

Método de Penalidades

Método de Penalidade Exterior

Função de penalidade

Uma função de penalidade deve atender as seguintes condições:

$$\begin{cases} p(\mathbf{x}) > 0, & \text{se } \mathbf{x} \notin \mathcal{F} \\ p(\mathbf{x}) = 0, & \text{se } \mathbf{x} \in \mathcal{F} \end{cases}$$

Método de Penalidades

Método de Penalidade Exterior

Função de penalidade

No caso de um problema com uma restrição de igualdade:

$$\begin{array}{ll} \min f(\mathbf{x}) \\ \text{s.a } h(\mathbf{x}) = 0 \end{array} \Rightarrow \min f(\mathbf{x}) + \underbrace{u [h(\mathbf{x})]^2}_{p(\mathbf{x}, u)}$$

No caso de um problema com uma restrição de desigualdade:

$$\begin{array}{ll} \min f(\mathbf{x}) \\ \text{s.a } g(\mathbf{x}) \leq 0 \end{array} \Rightarrow \min f(\mathbf{x}) + \underbrace{u \max [0, g(\mathbf{x})]^2}_{p(\mathbf{x}, u)}$$

Método de Penalidades

Método de Penalidade Exterior

Função de penalidade

De forma geral temos:

$$p(\mathbf{x}, u) = u \left\{ \sum_{i=1}^l \max [0, g_i(\mathbf{x})]^2 + \sum_{j=1}^m [h_j(\mathbf{x})]^2 \right\}$$

Método de Penalidades

Método de Penalidade Exterior

Exemplo

Seja o problema $\min f(x)$, com $f(x) = x$, sujeito a $g(x) = -x + 3 \leq 0$.

Método de Penalidades

Método de Penalidade Exterior

Exemplo

Seja o problema $\min f(x)$, com $f(x) = x$, sujeito a $g(x) = -x + 3 \leq 0$.

Solução

Usando $p(x) = \max[0, g(x)]^2$, tem-se:

$$p(x) = \begin{cases} 0, & x \geq 3 \\ (3 - x)^2, & x < 3 \end{cases}$$

Para $x < 3$, $f(x) + p(x, u) = x + u(3 - x)^2$. Assim:

$$\frac{df}{dx} = 1 - 2u(3 - x) = 0 \rightarrow x^* = 3 - \frac{1}{2u}$$

Com $u \rightarrow \infty$, temos $x^* \rightarrow 3^-$.

Método de Penalidades

Método de Penalidade Exterior

Exemplo

Seja o problema

$$\begin{aligned} \min f(\mathbf{x}) &= (x_1 - 5)^2 + (x_2 - 6)^2 \\ \text{s.a } h(\mathbf{x}) &= x_1 - 2 = 0 \end{aligned}$$

Método de Penalidades

Método de Penalidade Exterior

Algorithm 1: Método de Penalidade Exterior

Input: $\mathbf{x}_0 \in \mathcal{X}$, $u_0 > 0$, função-objetivo $f(\cdot)$ e restrições $\mathbf{g}(\cdot)$ e $\mathbf{h}(\cdot)$

```
1  $k \leftarrow 0$ ;  
2 while  $\neg$  critério de parada do  
3   Começando de  $\mathbf{x}_k$ , encontre  $\mathbf{x}_{k+1} \leftarrow \arg \min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) + p(\mathbf{x}, u_k)$ ;  
4    $u_{k+1} \leftarrow \alpha u_k$ , com  $\alpha > 1$  ;  
5    $k \leftarrow k + 1$ ;  
6 end
```

Método de Penalidades

Método de Penalidade Interior

- No método de barreira, deve-se construir uma função que penaliza tentativas de sair da região factível.

Função de barreira

Uma função de barreira deve atender as seguintes condições:

$$\begin{cases} b(\mathbf{x}) \rightarrow \infty, & \text{se } \mathbf{x} \rightarrow \partial\mathcal{F} \\ b(\mathbf{x}) \rightarrow 0^+, & \text{se } \mathbf{x} \in \mathcal{F} \end{cases}$$

Método de Penalidades

Método de Penalidade Interior

- $b(x)$ é uma função barreira não negativa e contínua em $\mathcal{F}$ e tende a infinito à medida que aproximamos da fronteira.
- Formulando o problema como a minimização de $f(\mathbf{x}) + b(\mathbf{x}, u)$, com $u \rightarrow 0^+$, gera-se uma sequência de soluções no interior de $\mathcal{F}$ que converge para $\mathbf{x}^*$.

Método de Penalidades

Método de Penalidade Interior

Função de barreira

Uma possível função barreira é

$$\begin{array}{ll} \min f(\mathbf{x}) \\ \text{s.a } g(\mathbf{x}) \leq 0 \end{array} \Rightarrow \min f(\mathbf{x}) + \underbrace{(-u) \log [-g(\mathbf{x})]}_{b(\mathbf{x}, u)}$$

Método de Penalidades

Método de Penalidade Interior

Função de barreira

Uma possível função barreira é

$$\begin{array}{ll} \min f(\mathbf{x}) \\ \text{s.a } g(\mathbf{x}) \leq 0 \end{array} \Rightarrow \min f(\mathbf{x}) + \underbrace{(-u) \log [-g(\mathbf{x})]}_{b(\mathbf{x}, u)}$$

Outra opção mais usada na prática é:

$$\begin{array}{ll} \min f(\mathbf{x}) \\ \text{s.a } g(\mathbf{x}) \leq 0 \end{array} \Rightarrow \min f(\mathbf{x}) + \underbrace{(-u) \frac{1}{g(\mathbf{x})}}_{b(\mathbf{x}, u)}$$

Método de Penalidades

Método de Penalidade Interior

Função de barreira

De forma geral temos:

$$b(\mathbf{x}, u) = -u \left\{ \sum_{i=1}^l \frac{1}{g_i(\mathbf{x})} \right\}$$

- Observe que não é possível definir uma função barreira para restrições de igualdade!

Método de Penalidades

Método de Penalidade Interior

Exemplo

Seja o problema $\min f(x)$, com $f(x) = x$, sujeito a $g(x) = -x + 3 \leq 0$.

Método de Penalidades

Método de Penalidade Interior

Exemplo

Seja o problema $\min f(x)$, com $f(x) = x$, sujeito a $g(x) = -x + 3 \leq 0$.

Solução

Usando a função barreira, tem-se:

$$f(x) + b(x, u) = x + u \frac{1}{x - 3}$$

Assim:

$$\frac{d}{dx} \left(x + u \frac{1}{x - 3} \right) = 1 - u \frac{1}{(x - 3)^2} = 0 \rightarrow x^* = 3 + \sqrt{u}$$

Com $u \rightarrow 0^+$, temos $x^* \rightarrow 3^+$.

Método de Penalidades

Método de Penalidade Interior

Algorithm 2: Método de Penalidade Interior

Input: $\mathbf{x}_0 \in \mathcal{F}$, $u_0 > 0$, função-objetivo $f(\cdot)$ e restrições $\mathbf{g}(\cdot)$ e $\mathbf{h}(\cdot)$

```
1  $k \leftarrow 0$ ;  
2 while  $\neg$  critério de parada do  
3   | Começando de  $\mathbf{x}_k$ , encontre  $\mathbf{x}_{k+1} \leftarrow \arg \min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) + b(\mathbf{x}, u_k)$ ;  
4   |  $u_{k+1} \leftarrow \alpha u_k$ , com  $0 < \alpha < 1$  ;  
5   |  $k \leftarrow k + 1$ ;  
6 end
```

Método de Penalidades

Considerações finais

A teoria prevê que a solução converge para a solução ótima quando $u_k \rightarrow \infty$ (ou $u_k \rightarrow 0^+$), porém:

- A Hessiana da função-objetivo penalizada depende de u_k e pode apresentar mal-condicionamento numérico;
- A variação de u_k deve ser gradual;
- A precisão final fica bastante limitada.

Método de Penalidades

Considerações finais

Diversas modificações podem ser feitas na abordagem por penalidades:

- Usar termos de penalidade distintos para cada restrição evitando problemas de escala;
- Penalizar apenas a restrição mais violada;
- Vários trabalhos publicados na área.

Método do Lagrangeano Aumentado

Introdução

- Conforme vimos, uma das dificuldades dos métodos de penalidade é o mal-condicionamento numérico causado ao se fazer $u \rightarrow \infty$ ou $u \rightarrow 0^+$;
- O método LA é uma extensão dos métodos de penalidades, porém sem o problema de tornar a função de penalidade mal-condicionada com a variação de u .

Método do Lagrangeano Aumentado

Introdução

Seja o problema

$$\min f(\mathbf{x}) \text{ sujeito a } h(\mathbf{x}) = 0$$

Usando a função de penalidade, temos:

$$p(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) + \frac{u}{2} [h(\mathbf{x})]^2$$

de tal forma que quando $u \rightarrow \infty$, temos $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}^*$ e:

$$\nabla p(\mathbf{x}^*) = \nabla f(\mathbf{x}^*) + uh(\mathbf{x}^*)\nabla h(\mathbf{x}^*) = 0$$

Da função Lagrangeana, sabemos que:

$$\nabla L(\mathbf{x}^*, \lambda^*) = \nabla f(\mathbf{x}^*) + \lambda^* \nabla h(\mathbf{x}^*) = 0$$

Método do Lagrangeano Aumentado

Introdução

- Comparando as duas expressões, observa-se que

$$\lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}^*} uh(\mathbf{x}) \rightarrow \lambda^*$$

- O produto $uh(\mathbf{x})$ traz, no limite, a dificuldade de um produto $\infty \cdot 0$;
- No método LA, consideramos a seguinte função Lagrangeana Aumentada:

$$\begin{aligned} L_A(\mathbf{x}, \lambda, u) &= L(\mathbf{x}, \lambda) + \frac{u}{2} \sum_i [h_i(\mathbf{x})]^2 \\ &= f(\mathbf{x}) + \sum_i \lambda_i h_i(\mathbf{x}) + \frac{u}{2} \sum_i [h_i(\mathbf{x})]^2 \end{aligned}$$

Método do Lagrangeano Aumentado

Introdução

- O ótimo da função Lagrangeana Aumentada coincide com o ótimo da função Lagrangeana;
- Em um ponto não crítico $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}^*$:

$$\nabla_{\mathbf{x}} L_A(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, u) = \nabla f(\mathbf{x}) + \sum_i [\lambda_i + u h_i(\mathbf{x})] \nabla h_i(\mathbf{x})$$

- Próximo ao ponto solução, espera-se:

$$\lambda_i + u h_i(\mathbf{x}) \approx \lambda^*$$

Método do Lagrangeano Aumentado

Introdução

- A equação anterior sugere uma fórmula de atualização recursiva dos multiplicadores de Lagrange:

$$\lambda_i^{k+1} = \lambda_i^k + u_k h_i(\mathbf{x}_k)$$

- Não há necessidade de fazer $u \rightarrow \infty$;
- A minimização de L_A é mais estável numericamente;

Método do Lagrangeano Aumentado

Introdução

- De forma geral, temos:

$$L_A(\mathbf{x}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\lambda}, u) = f(\mathbf{x}) + \sum_i \mu_i g_i(\mathbf{x}) + \sum_j \lambda_j h_j(\mathbf{x}) + \\ + \frac{u}{2} \sum_i \max[0, g_i(\mathbf{x})]^2 + \frac{u}{2} \sum_j [h_j(\mathbf{x})]^2$$

ou ainda

$$L_A(\mathbf{x}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\lambda}, u) = f(\mathbf{x}) + \frac{u}{2} \left\{ \sum_i \left[\max \left(g_i(\mathbf{x}), -\frac{\mu_i}{u} \right) \right]^2 + \sum_j \left[h_j(\mathbf{x}) + \frac{\lambda_j}{u} \right]^2 \right\}$$

Método do Lagrangeano Aumentado

Algoritmo

Algorithm 3: Método do Lagrangeano Aumentado

Input: $\mathbf{x}_0 \in \mathcal{X}$, $\boldsymbol{\mu}_0$, $\boldsymbol{\lambda}_0$, u_0 , função-objetivo $f(\cdot)$ e restrições $\mathbf{g}(\cdot)$ e $\mathbf{h}(\cdot)$

```
1  $k \leftarrow 0$ ;  
2 while  $\neg$  critério de parada do  
3   Começando de  $\mathbf{x}_k$ , encontre  $\mathbf{x}_{k+1} \leftarrow \arg \min_{\mathbf{x}} L_A(\mathbf{x}, \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\lambda}_k, u_k)$ ;  
4    $\mu_i^{k+1} \leftarrow \mu_i^k + u_k \max \left[ g_i(\mathbf{x}_{k+1}), -\frac{\mu_i^k}{u_k} \right]$  ;  
5    $\lambda_j^{k+1} \leftarrow \lambda_j^k + u_k h_j(\mathbf{x}_{k+1})$  ;  
6    $u_{k+1} \leftarrow \alpha u_k$  ;  
7    $k \leftarrow k + 1$ ;  
8 end
```

Método do Lagrangeano Aumentado

Considerações finais

Vantagens

- A penalidade u não precisa tender a infinito, pode ser aumentada de forma suave;
- A solução inicial não precisa ser factível;
- É possível encontrar $g_i(\mathbf{x}) = 0$ e $h_j(\mathbf{x}) = 0$ com precisão;
- Os multiplicadores de Lagrange diferentes de zero identificam as restrições ativas no ponto solução.